

УДК 621.315.592

## МЕЖЦЕНТРОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ЧАСТИЧНО РАЗУПОРЯДОЧЕННОМ КРЕМНИИ: РАСЧЕТ

В. С. Львов, В. И. Стрижа, О. В. Третьяк,  
А. А. Шматов

В неадиабатическом приближении проведен расчет вероятности переходов с участием одно- и двухэлектронных состояний, проанализированы полевые зависимости частотного фактора и энергии активации межцентровых переходов, проведен необходимый расчет для определения параметров модели генерационно-рекомбинационных переходов в разупорядоченном кремнии.

Часто возникают сложности в однозначной интерпретации особенностей электронных переходов при изучении генерационно-рекомбинационных явлений в полупроводниках или полупроводниковых структурах со сложным спектром локализованных состояний в запрещенной зоне. К таким объектам можно отнести реальную поверхность полупроводников, аморфные и поликристаллические полупроводники, полупроводники с большой плотностью дислокаций, границы раздела в контакте металла с полупроводником и на переходе и т. д. Анализ экспериментальных данных по генерационно-рекомбинационным процессам, полученным в по-

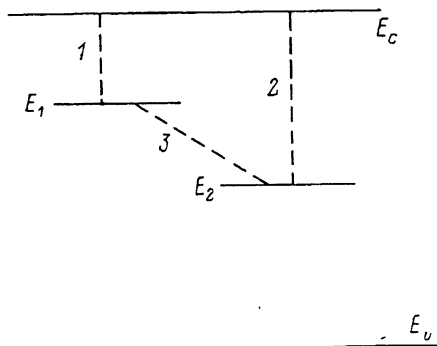


Схема электронных переходов.

следнее время, показал, что основной рекомбинационный канал на указанных материалах, как правило, включает электронные межцентровые переходы.

Привлечение сведений о спиновых состояниях носителей заряда существенно расширило возможности исследований особенностей электронных переходов в таких полупроводниках. Существует несколько моделей [1-3], объясняющих зависимость скорости рекомбинации неравновесных носителей заряда от спиновых состояний свободных и локализованных электронов. Модель Каплана—Соломона—Мотта [3], учитывающая рекомбинацию носителей через парные состояния, получила прямое экспериментальное подтверждение [3-5]. На рисунке изображена соответствующая схема генерационно-рекомбинационных переходов. При этом оказалось [6], что каждый из рассматриваемых центров пары на большинстве изученных объектов может находиться как в одноэлектронном, так и в двухэлектронном состояниях.

В настоящее время нет достаточной ясности в происхождении и физике двухэлектронных состояний, мало известно о самих парных состояниях: радиусе электронных волновых функций состояний, расстоянии

между партнерами пар, не обсуждены методы определения параметров этих состояний.

В двух наших работах (первая — наст. вып., с. 197, вторая — с. 206) мы попытаемся ответить на большинство сформулированных выше вопросов. В первой работе приведен расчет переходов с участием одно- и двух-электронных состояний, проанализированы полевые зависимости частотного фактора и энергии активации межцентровых переходов; получены соотношения, необходимые для определения параметров модели генерационно-рекомбинационных переходов в разупорядоченном кремнии. Во второй работе приводятся экспериментальные данные на частично разупорядоченном кремнии и их обсуждение с учетом результатов первой работы: оценены радиусы электронных волновых функций ( $4-7 \text{ \AA}$ ) и расстояние между партнерами пар ( $25-40 \text{ \AA}$ ), дано объяснение полевой зависимости частотного фактора и энергии.

### 1. Локализованные на дефектах структуры электронные состояния и поляронный эффект

Рассмотрим некий дефект структуры в идеальной периодической решетке, например вакансию в кремнии. Среди различных типов локальных колебаний атомов, связанных с этим дефектом, выберем наиболее «мягкую» моду, конфигурационную координату которой обозначим  $X$ . Следуя Холстейну [7, 8] и Андерсену [9], будем считать, что искажение атомной системы дефекта, возникающее, например, из-за захвата им электрона, будет обусловлено только этой самой мягкой модой. Имея в виду получить наиболее простое описание такого дефекта, захватившего  $n=0, 1, 2$  электронов, мы, следуя традиции [7-11], ограничимся гармоническим приближением для энергии атомной подсистемы  $kX^2/2$  и линейным приближением для ее энергии взаимодействия с захваченными электронами  $-nQX$ , где  $Q$  — деформационный потенциал. Полная энергия системы

$$W(X, n) = kX^2/2 - nQX + n\varepsilon + U_c \delta_{n2} \quad (1)$$

включает также одноэлектронную энергию  $n\varepsilon$  и энергию кулоновского расталкивания  $-U_c$ , которая «включается» только при  $n=2$ .

Минимизация (1) по  $X$  позволяет найти равновесные энергии системы  $E(n)$  и равновесные смещения  $X^0(n)$

$$E(n) = n\varepsilon - n^2W + U_c \delta_{n2}, \quad X^0(n) = nX^0, \quad X^0 = Q/k, \quad (2)$$

$W$  — поляронный сдвиг

$$W = Q^2/2k. \quad (3)$$

Если поляронный сдвиг достаточно велик, так что энергия Хаббарда

$$U = E(2) - 2E(1) = -2W + U_c \quad (4)$$

становится отрицательной, то двум электронам находиться на одном центре будет выгоднее, чем на двух разных.

В разупорядоченных полупроводниках причина большого полярного эффекта заключается в аномально малой величине жесткости  $k$  для растянутых связей. Для нас будет важно то, что растянутые связи возникают на дислокациях и, следовательно, вокруг дислокаций могут концентрироваться  $U$ -центры с большим поляронным эффектом. Поэтому даже в относительно слабо деформированных полупроводниках, в которых общее число таких центров мало, вероятность их близкого расположения в координатном пространстве может оказаться заметной. В свою очередь это может привести к переходам между  $U$ -центрами и соответственно к спин-зависимым эффектам в генерации и рекомбинации носителей тока.

## 2. Неадиабатические электронные переходы между $U$ -центрами

В интересующей нас области параметров энергия активации (или высота барьера), соответствующая переходу электрона между двумя  $U$ -центрами, существенно превышает энергию  $T$ . Поэтому эти переходы являются многофононными. При этом возбуждения атомной подсистемы можно рассматривать классически, на языке конфигурационных координат интересующих нас центров  $X_1$  и  $X_2$ . Можно утверждать, что под действием температуры происходят механические колебания с частотами, не превышающими дебаевские, при этом электронные состояния в дефектах успевают адиабатически подстроиться под текущие состояния конфигурационных координат  $X_1(t)$  и  $X_2(t)$ . При некоторых смещениях, соответствующих пересечению электронных термов, может происходить переход электрона между центрами с частотой  $\gamma(X_1, X_2)$ . Величину  $\gamma$  просто определить по квантовомеханической теории возмущений [12]

$$\hbar\gamma(X_1, X_2) = 2\pi |\mathcal{J}|^2 \mathfrak{B} [W_-(X_1, X_2) - W_+(X_1, X_2)]. \quad (5)$$

Здесь  $W_+(X_1, X_2)$ ,  $W_-(X_1, X_2)$  — энергии двух центров до и после перехода электрона с первого центра на второй при фиксированных значениях конфигурационных координат  $X_1$  и  $X_2$ ; энергетический интеграл перекрытия  $\mathcal{J}$  есть матричный элемент в гамильтониане перехода

$$\mathcal{H} = \mathcal{J} (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1). \quad (6)$$

Если за время одного прохождения резонанса  $W_+ = W_-$  вероятность перехода мала (неадиабатический режим), то интерференцией между различными прохождениями резонанса можно пренебречь и полная частота перехода находится усреднением  $\gamma(X_1, X_2)$  по различным конфигурациям системы двух центров  $X_1, X_2$  с бoльцмановской функцией вероятности [13]

$$f(X_1, X_2) = Z^{-1} \exp [(W_-(X_1^0, X_2^0) - W_-(X_1, X_2))/T]. \quad (7)$$

Здесь  $X_1^0, X_2^0$  — равновесные смещения на центрах «1» и «2»;  $Z$  — статсумма, определяемая условием нормировки вероятности. Итак,

$$\gamma = \int f(X_1, X_2) \gamma(X_1, X_2) dX_1 dX_2. \quad (8)$$

## 3. Зависимость интеграла перекрытия от конфигурационных координат

При вычислении частоты перехода  $\gamma$  обычно не учитывают зависимость  $\mathcal{J}$  от  $X_1$  и  $X_2$  (см., например, [14]). Ниже будет показано, что это приближение может оказаться неверным.

Рассмотрим дефект с характерным размером  $a$ , порядка нескольких постоянных решетки  $a_0$ . На расстоянии от центра дефекта  $r > a$  поле дефекта обращается в нуль, поэтому  $\Psi$  — функция электрона — будет убывать с увеличением  $r$  универсальным образом, не зависящим от характера дефекта. В приближении эффективной массы, когда кристалл представляет для электрона сплошную среду, функция  $\Psi$  при  $r > a$  будет удовлетворять свободному уравнению Шредингера. В сферическом симметричном случае [12]

$$\Psi \propto r^{-1} \exp(-xr). \quad (9)$$

Радиус локализации электрона  $r_0 = 1/x$  зависит только от его энергии  $\epsilon$ , отсчитанной от дна зоны проводимости

$$\hbar^2 x^2 / 2m = -\epsilon, \quad \epsilon < 0. \quad (10)$$

Вычисляя матричный элемент оператора кинетической энергии электрона на функциях (9)  $\Psi(r)$  и  $\Psi(R-r)$ , получим асимптотическую (при

больших  $R$ ) известную зависимость энергетического интеграла перекрытия от расстояния между центрами  $R$

$$\mathcal{J}(R) = \mathcal{J}_0 \exp(-\alpha R). \quad (11)$$

Здесь  $\mathcal{J}_0 \approx \varepsilon/2$ ; для глубоких центров в кремнии можно считать  $\mathcal{J}_0 \approx 0.1 \div 0.2$  эВ.

Эта оценка нам понадобится в дальнейшем при анализе экспериментальных данных. Следует обратить внимание на то, что  $\alpha$  в (11) зависит от  $\varepsilon$  в соответствии с (10), причем  $\varepsilon$  представляет собой энергию электрона, совершающего переход между «1» и «2» в состоянии, которое адиабатически подстроено под текущие значения конфигурационных координат  $X_1$  и  $X_2$ . Для перехода  $|0, 2\rangle \rightarrow |1, 1\rangle$  (в начальном состоянии на первом центре два электрона, на втором — ни одного; в конечном — на каждом центре по одному электрону)

$$\varepsilon = \varepsilon_2 - Q_2 X_2 + U_{c2} = \varepsilon_1 - Q_1 X_1. \quad (12)$$

Теперь видно, что энергетический интеграл перекрытия экспоненциально (сильно) зависит от  $X_1$  и  $X_2$ . Поэтому, выполняя в (8) интегрирование по  $X_1, X_2$ , этой зависимостью, вообще говоря, нельзя пренебрегать.

#### 4. Частота переходов $|0, 2\rangle \rightarrow |1, 1\rangle$ в неадиабатическом режиме

В рамках описанных представлений найдем частоту перехода  $\gamma(0, 2 \rightarrow 1, 1)$ , при котором в начальном состоянии два электрона находились на втором центре, а первый был пустым, в конечном — на каждом центре было по одному электрону. Природа этих центров может быть разной, поэтому мы будем отличать деформационный потенциал  $Q$  и другие феноменологические параметры центров, снабдив их индексами «1» и «2». Из формул (1), (2) следует

$$\begin{aligned} W_-(X_1, X_2) &= (k_1 X_1^2 + k_2 X_2^2)/2 - 2Q_2 X_2 + 2\varepsilon_2 + U_{c2}, \\ W_0 &\equiv W_-(X_1^0, X_2^0) = 2\varepsilon_2 - 4W_2 + U_{c2}, \\ W_+(X_1, X_2) &= (k_1 X_1^2 + k_2 X_2^2)/2 - Q_1 X_1 - Q_2 X_2 + \varepsilon_1 + \varepsilon_2. \end{aligned} \quad (13)$$

В соответствии с (7), (13) функция вероятности имеет гауссов вид

$$\begin{aligned} f &= Z^{-1} \exp[-(k_2(X_2 - 2X_2^0)^2 + k_1 X_1^2)/2T] \\ Z &= 2\pi T / (k_1 k_2)^{1/2}, \quad X_2^0 = Q_2/k_2. \end{aligned} \quad (14)$$

Подставляя формулы (11) и (13) в (5), формулы (14) и (5) в (8), получим исходное выражение для частоты перехода  $|0, 2\rangle \rightarrow |1, 1\rangle$

$$\begin{aligned} \gamma &= (\sigma_0^2 \sqrt{k_1 k_2} / \hbar^2 T) \int \exp(-\Phi(X_1, X_2)) \delta(Q_1 X_1 - Q_2 X_2 - \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + U_{c2}) dX_1 dX_2, \\ \Phi &= 2\alpha(\varepsilon)R + (W_-(X_1, X_2) - W_0)/T. \end{aligned} \quad (15)$$

Интеграл по  $X_2$  можно вычислить с помощью  $\delta$ -функции, по  $X_1$  — методом перевала. Перевальная точка  $X_1, X_2$  определяется условием минимума  $\Phi$

$$\begin{aligned} k_1 X_1 + k_2 X_2 Q_1 / Q_2 &= Q_1 [2 - \alpha(\varepsilon)RT / |\varepsilon|], \\ \varepsilon_1 - Q_1 X_1 &= -Q_2 X_2 + \varepsilon_2 + U_{c2} = \varepsilon(X_1, X_2) \equiv \bar{\varepsilon}. \end{aligned} \quad (16)$$

Мы учли, что в соответствии с (10)  $\alpha(\varepsilon) \propto \sqrt{-\varepsilon}$ , а  $\varepsilon$  определяется соотношением (12). Вычислим в перевальной точке  $\Phi''$

$$\Phi'' = d^2\Phi/dX_1^2 = k_2 [(W_1 + W_2)/TW_2 - \alpha RW_2/\varepsilon^2].$$

Наши вычисления справедливы, если расстояние между центрами не слишком велико, так что  $\Phi'' > 0$ . Это дает условие

$$\alpha R < \varepsilon^2 (W_1 + W_2). \quad (17)$$

Если ввести характерную температуру

$$T^* = T\bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2) / [\bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2) - \alpha(\bar{\varepsilon}) RTW_2^2], \quad (18)$$

то условие (17) можно переписать в виде  $T^* > 0$ . Предполагая его выполненным, получим из (15)–(18) частоту активационного перехода между состояниями  $|0, 2\rangle \rightarrow |1, 1\rangle$

$$\gamma(0, 2 \rightarrow 1, 1) = (\pi T^*)^{1/2} \mathcal{J}^2(\bar{\varepsilon}) \exp(-\Delta E_g/T) / \hbar T (W_1 + W_2)^{1/2}. \quad (19)$$

Здесь  $\mathcal{J}(\bar{\varepsilon})$  — энергетический интеграл перекрытия (11), (10) при перенормированном значении  $\bar{\varepsilon}$  энергии туннелирующего электрона (12)

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{W_1 + W_2} [W_1 \varepsilon_2 + W_2 (\varepsilon_1 + U_{c2} - 4W_1) + 2W_1 W_2 T \alpha R / |\bar{\varepsilon}|], \quad (20)$$

$\Delta E_g$  — энергия активации исследуемого перехода  $|0, 2\rangle \rightarrow |1, 1\rangle$ . Она равна

$$\Delta E_g = \Delta E - \Delta E_r, \quad (21)$$

где

$$\Delta E = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - U_{c2} + 3W_2 - W_1 \quad (22)$$

— разность равновесных по конфигурационным координатам  $X_1$  и  $X_2$  энергий (2) двух электронов после перехода (в состоянии  $|1, 1\rangle$ ) и до перехода (в состоянии  $|0, 2\rangle$ );  $\Delta E_r = \Delta E_{r1} + \Delta E_{r2}$  — энергия конфигурационного барьера. Она состоит из известного ранее слагаемого  $\Delta E_{r1}$  [15] и дополнительного слагаемого  $\Delta E_{r2}$ , возникающего из-за зависимости интеграла перекрытия от энергии

$$\begin{aligned} \Delta E_{r1} &= [\varepsilon_1 - \varepsilon_2 - U_{c2} - 2W_1 + 2W_2]^2 / 4 (W_1 + W_2), \\ \Delta E_{r2} &= (\alpha R)^2 W_2^2 W_1 T^2 / \bar{\varepsilon}^4 (W_1 + W_2)^3. \end{aligned} \quad (23)$$

Эта энергия входит в температурную экспоненту для частоты обратного (рекомбинационного) перехода ( $|1, 1\rangle \rightarrow |0, 2\rangle$ )

$$\gamma(1, 1 \rightarrow 2, 0) = \sqrt{\pi T^*} \mathcal{J}^2(\bar{\varepsilon}) \exp(-\Delta E_r/T) / \hbar T (W_1 + W_2)^{1/2}. \quad (24)$$

Зависимость  $\mathcal{J}(\varepsilon)$  привела к нескольким эффектам. Во-первых, в числителе предэкспоненциального множителя температура  $T \rightarrow T^* > T$ . Во-вторых, в соответствии с (20) увеличилась энергия туннелирующего электрона и соответственно увеличился интеграл перекрытия  $\mathcal{J}(\bar{\varepsilon})$ . Наконец, увеличился конфигурационный барьер (23). Если через  $\gamma_0$  обозначить частоту перехода без учета зависимости  $\mathcal{J}(\varepsilon)$ , то с учетом этого фактора

$$\gamma_0 \rightarrow \gamma = \gamma_0 \sqrt{\frac{T^*}{T}} \exp \left[ (\alpha R)^2 \frac{W_1 W_2 T}{\bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2)} \left( 2 - \frac{W_2^2}{\bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2)} \right) \right]. \quad (25)$$

Это соотношение справедливо как для генерационного, так и для рекомбинационного переходов. При его выводе мы предполагали, что относительное изменение энергии электрона  $\delta\bar{\varepsilon}$  мало, и разложили  $\alpha(\bar{\varepsilon} + \delta\bar{\varepsilon}) = \alpha(\bar{\varepsilon}) [1 - \delta\bar{\varepsilon}/2\bar{\varepsilon}]$ .

Проделанные выше вычисления справедливы, если расстояние между центрами не слишком велико, так что  $T^* > 0$ . В обратном случае энергии  $\bar{\varepsilon}$  соответствует не минимум, а максимум показателя экспоненты  $\Phi$  в (15). Это означает, что при больших расстояниях между центрами наиболее выгодными для междоцентровых переходов становятся такие большие флуктуации  $X_1, X_2$ , когда  $\bar{\varepsilon} \rightarrow 0$ , т. е. энергия туннелирующего электрона приближается к дну зоны проводимости и радиус локализации электрона на центре  $r_0 \sim 1/\chi \sim 1/\sqrt{|\bar{\varepsilon}|}$  становится больше, чем расстояние между центрами. В этом случае в выражениях для частоты переходов исчезает экспоненциальная малость интеграла перекрытия  $\mathcal{J} \exp(-\alpha R)$  и это компенсирует дополнительную малость в температурной экспоненте.

## 5. Неадиабатические межцентровые переходы в электрическом поле

а) Механизмы зависимости вероятности переходов от электрического поля. Однородное в пространстве и постоянное во времени электрическое поле  $\mathcal{E}$  должно влиять на частоту межцентровых переходов по целому ряду причин.

1. Прежде всего энергия электрона  $\epsilon_n$ , локализованного на центре с координатой  $r_n$ , приобретает добавку  $-\delta\epsilon_n$ . В соответствии с формулами (20)—(22) это приведет к следующему изменению энергии конфигурационного барьера  $\Delta E_r$  и энергии активации  $\Delta E_g$ :

$$\begin{aligned} \Delta E_r \rightarrow \Delta E_r + \delta E_r, \quad \Delta E_g \rightarrow \Delta E_g + \delta E_g, \quad \delta E_r = \delta\epsilon [\delta\epsilon + 4W_2 - 4W_1 - 2U_{c2}]/4 (W_1 + W_2), \\ \delta E_g = \delta E_r + \delta\epsilon, \quad \delta\epsilon = e\mathcal{E}R, \quad R = r_1 - r_2. \end{aligned} \quad (26)$$

Для оценки величины  $\delta\epsilon$ , которую можно легко достичь в эксперименте, возьмем в качестве  $\mathcal{E}$  обычное значение для обратно смещенного  $p$ — $n$  перехода в Si:  $|\mathcal{E}| \approx 10^5$  В/см, и пусть расстояние между центрами  $|R| \approx 100$  Å. Тогда изменение высоты активационного барьера изменит частоту перехода при комнатной температуре в  $\exp(\delta\epsilon/T)$  раз, т. е. на три-четыре порядка.

2. Кроме того, электрическое поле изменяет состояние электрона на центре и, следовательно, его энергию  $\epsilon_n$ , отсчитанную от дна зоны проводимости. В поле  $\mathcal{E}$  к выражению для энергии (1) следует добавить  $-\beta ne |\mathcal{E}| X$ , где численный коэффициент  $\beta$  порядка единицы. Конкретное значение  $\beta$  зависит от вида конфигурационной координаты  $X$ . Таким образом, в электрическом поле в выражении (1)  $Q \rightarrow Q + \beta e\mathcal{E}$ . Для вакансии в Si [16]  $Q \approx 1$  эВ/Å. В поле  $|\mathcal{E}| \approx 10^5$  В/см  $e |\mathcal{E}| = 1.3 \cdot 10^{-3}$  эВ/Å, т. е.  $e |\mathcal{E}| / Q \approx 10^{-2} \div 10^{-3}$ . В соответствии с (3) изменение поляронного сдвига в поле  $\delta W = 2W\beta e |\mathcal{E}| / Q$ . Величина  $W$  порядка 0.2—0.3 эВ, поэтому  $\delta W \approx 10^{-3}$  эВ. Различие в  $W$  на двух центрах вызывает дополнительное по отношению к (26) изменение энергии активации, которую следует сравнивать с энергией  $T$ . Приведенные выше оценки показывают, что, за исключением области температур  $T < 10$  К, влиянием электрического поля на  $W$  можно пренебречь.

3. Вообще говоря, под действием  $\mathcal{E}$  изменяется положение центра тяжести электронного облака на центре и, следовательно, эффективное расстояние между центрами. Однако этот эффект ничтожно мал:  $\Delta R \approx e |\mathcal{E}| / k$  для  $|\mathcal{E}| \approx 10^6$  В/см,  $k \approx 10$  эВ/Å. Даже при  $1/x \approx a_0 \approx 5$  Å относительное изменение интеграла перекрытия будет меньше, чем  $10^{-2}$ .

4. Наконец, необходимо учесть то, что электрическое поле прямо влияет на интеграл перекрытия при фиксированном расстоянии между центрами. Этот важный эффект будет рассмотрен в следующем разделе.

б) Зависимость интеграла перекрытия от электрического поля. Электрическое поле влияет на вид волновой функции  $\Psi(\mathbf{r})$  электрона, туннелирующего между центрами. В пространстве между центрами  $\Psi(\mathbf{r})$  удовлетворяет следующему уравнению Шредингера ( $z$  — направление электрического поля):

$$-\hbar^2 \Delta^2 \Psi / 2m = (E - e |\mathcal{E}| z) \Psi. \quad (27)$$

Решение  $\Psi(\mathbf{r})$  будем искать в квазиклассическом приближении

$$\Psi(\mathbf{r}) = \exp(-S(\mathbf{r})), \quad S = \hbar S_0 + \hbar^2 S_1. \quad (28)$$

Отсюда в аксиально-симметричном случае для  $S_0$  получим

$$(\partial S_0 / \partial z)^2 + (\partial S_0 / \partial \rho)^2 = (1 - 2e |\mathcal{E}| mz) x^2 \equiv x^2(z). \quad (29)$$

Здесь  $\rho$  — поперечная координата,  $1/x$  — радиус локализации электрона в отсутствие поля (10). Формула (29) представляет собой уравнение Гамильтона—Якоби для не зависящей от времени части эвклидова действия

$S_0$  классической частицы, движущейся (во мнимом времени) под действием постоянной силы. Траектория такого движения находится тривиально: интегрируя функцию Лагранжа по времени вдоль классической траектории, находим действие и выражаем  $S_0$  через координаты начальной  $z=0$ ,  $\rho=0$  и конечной точки движения  $z$ ,  $\rho$ . В результате имеем

$$S_0(\rho, z) = (3e|\mathcal{E}|m)^{-1} [(x^2(z/2) + e|\mathcal{E}|mz)^{3/2} - (x^2(z/2) - e|\mathcal{E}|mz)^{3/2}], \\ x^2(z/2) = x^2 - e|\mathcal{E}|mz, \quad r^2 = z^2 + \rho^2. \quad (30)$$

В справедливости этого решения легко убедиться прямой подстановкой его в (29). Для того чтобы проанализировать полученное выражение (30) для  $S_0$ , разложим его в ряд по  $r$

$$S_0 = x(z/2)r [1 - r^2/24z_0^2 - \dots], \quad z_0 = x^2(z/2)/e|\mathcal{E}|m. \quad (31)$$

Здесь  $z_0$  — расстояние по оси  $z$  от точки с координатой  $z/2$  до точки поворота, где  $x^2(z)=0$ . Отметим, что разложение (31) обладает хорошей сходимостью: даже на границе применимости при  $r=z_0$  два выписанных в (31) члена обеспечивают точность  $1.5 \cdot 10^{-2}$ ; если же  $r \leq 2z_0$ , то с точностью до  $10^{-2}$  вообще можно ограничиться первым членом разложения, т. е. считать, что  $S_0 = x^2(z/2)r$ . В этом приближении влияние электрического поля на показатель экспоненты свелось к перенормировке радиуса локализации  $x \rightarrow x(z/2) = (x^2 - e|\mathcal{E}|mz)^{1/2}$ . Этот результат можно интерпретировать так: для того чтобы вычислить квазиклассический набег фазы  $S_0$  в точке с некоторой координатой  $z_1$ ,  $r_1 = \sqrt{\rho_1^2 + z_1^2}$ , можно в уравнении (29) заменить  $x^2(z)$  на среднее значение этой величины вдоль классической траектории, т. е. на  $x^2(Z_1/2)$ . Полученное уравнение тривиально решается. В сферическом случае  $S_0 = x^2(z_1/2)r$ , что совпадает с первым членом разложения в (31).

В следующем порядке классического разложения (28) необходимо вычислить  $S_1$ , что определит предэкспоненциальный множитель в выражении для волновой функции. Поскольку при  $\mathcal{E}=0$  этот множитель не зависит от  $x$ , то влияние поля на предэкспоненту не может быть большим; и если не подходить слишком близко к точке поворота, то этим влиянием можно пренебречь в сравнении с полевой зависимостью показателя экспоненты  $x$ . Итак, мы приходим к следующему приближению для  $\Psi(r)$ , заменяющему формулу (9):

$$\Psi(r) \simeq \exp[-S_0(\rho, z)]/r. \quad (32)$$

При вычислении интеграла перекрытия с функциями (32) воспользуемся методом перевала. Перевальной является классическая траектория, соединяющая точки с координатами  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ , в которых расположены центры. В показателе экспоненты подынтегральной функции  $\propto \Psi(r-r_1) \Psi^*(r-r_2)$  стоит сумма эвклидовых действий, которая не зависит от положения точки  $\mathbf{r}$  на классической траектории и равна значению  $S_0(z_-, \rho_-)$  (30), если в качестве  $z_-$  и  $\rho_-$  подставить компоненты вектора  $R = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ :  $z = z_2 - z_1$ ,  $\bar{\rho} = \rho_1 - \rho_2$ . Таким образом определяется показатель экспоненты в интеграле перекрытия:  $\mathcal{J} \simeq \exp(-S_0(z, \rho))$ . Если  $R$  меньше, чем расстояние от точки  $(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  до точки поворота, то, как отмечалось выше, можно в разложении (31) ограничиться первым членом:  $S_0(z_-, \rho_-) = \bar{x}R$ ,  $\bar{x} \equiv x(z_-/2)$ . Если вспомнить, что в формулах (30), (31) положено  $r_1=0$ , то ясно, что  $z_-/2 = (z_1 + z_2)/2$ . При вычислении предэкспоненты в  $\mathcal{J}$  мы пренебрежем зависимостью  $x(z)$ , взяв  $x(z)$  в этой же точке:  $x = \bar{x}$ . В результате для  $\mathcal{J}$  получим формулу, похожую на (11)

$$\mathcal{J}(R) \simeq \mathcal{J}_0(\bar{x}) \exp(-\bar{x}R), \quad (33)$$

где  $\mathcal{J}_0(\bar{x}) \simeq \hbar^2 x^2 / 4m$ . Таким образом, в нашем приближении влияние электрического поля на интеграл перекрытия сводится к зависимости  $\bar{x}(\mathcal{E})$ ;  $\mathcal{J}$  следует вычислять по формуле (10) через энергию туннелирующего электрона  $\bar{\epsilon}$  (20), отсчитанную от дна зоны проводимости в точке с координатой

$\mathbf{r}=(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)/2$ . Пользуясь формулами (10), (20) и (2), получим выражение, описывающее изменение энергии  $\bar{\varepsilon}$  в электрическом поле  $\mathcal{E}$

$$\bar{\varepsilon} \rightarrow \bar{\varepsilon} + T^* \delta \varepsilon / 2T, \quad \delta \varepsilon = e \delta R. \quad (34)$$

Это изменение  $\bar{\varepsilon}$  приведет в соответствии с (23) к дополнительному по сравнению с (26) изменению высоты конфигурационного барьера

$$\begin{aligned} \Delta E_r &\rightarrow \Delta E_r + \delta E_r + \delta_1 E_r, \\ \delta_1 E_r &= \frac{3W_1 W_2 T^* T}{2(W_1 + W_2)} \left[ \frac{\kappa R W_2^2}{\bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2)} \right]^2 \delta \varepsilon. \end{aligned} \quad (35)$$

в) Влияние электрического поля на частоту междоуровневых переходов. Оценим общее изменение частоты генерационного перехода  $|0, 2\rangle \rightarrow |1, 1\rangle$ , обусловленное суммарным изменением показателя экспоненты в электрическом поле. Это изменение возникает из-за полевой зависимости энергии активации и конфигурационного барьера (26) и (34), а также интеграла перекрытия (33) и (34)

$$\gamma(\mathcal{E})/\gamma(0) = \exp[\delta \varepsilon (A + B/T + C) + (\delta \varepsilon)^2 (D + F/T)]. \quad (36)$$

Слагаемое  $A$  обусловлено изменением интеграла перекрытия в поле и получено разложением  $\bar{\varepsilon}(\varepsilon)$  в ряд с учетом (34) и (18)

$$A = \bar{\varepsilon} (W_1 + W_2) \kappa R / [2\bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2) - T W_2^2 \kappa R]. \quad (37)$$

Слагаемое  $B$  обусловлено полевой зависимостью энергии активации  $\Delta E_g$  (26)

$$B = (-2W_2 + U_{c2}) / (W_1 + W_2) = U_2 / (W_1 + W_2). \quad (38)$$

Здесь  $U_2$  — энергия Хаббарда. Слагаемое  $C$  связано с дополнительным изменением барьера  $\Delta E_r$  (35)

$$C = \frac{-3W_2^2 T W_1 (\kappa R)^2}{2[\bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2) - T (\kappa R) W_2^2] \bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2)^2}. \quad (39)$$

Слагаемое  $D$  обусловлено изменением интеграла перекрытия,  $F$  — изменением конфигурационного барьера (26)

$$D = \kappa R \bar{\varepsilon} (W_1 + W_2) / 16 [\bar{\varepsilon}^2 (W_1 + W_2) - T W_2^2 \kappa R], \quad F = -1/4 (W_1 + W_2). \quad (40), (41)$$

Если в этих формулах ограничиться эффектами, линейными по расстоянию между центрами, то

$$A = \kappa R / 2\bar{\varepsilon}, \quad B = U_2 / (W_1 + W_2), \quad C = 0, \quad D = \kappa R / 16\bar{\varepsilon}^2, \quad F = -1/T (W_1 + W_2). \quad (42)$$

Основной качественный вывод, следующий из (36) и (42), заключается в том, что электрическое поле по-разному действует на температурно-зависящую часть экспоненты (слагаемые  $B$ ,  $F$ ) и на температурно-независящую часть, линейную по  $R$  (слагаемые  $A$ ,  $D \propto \kappa R$ ). При  $\delta \varepsilon < 0$  высота энергетического барьера уменьшается и вероятность необходимых для перехода тепловых флуктуаций растет. Однако при этом вероятность туннелирования падает. Если расстояние между центрами не слишком велико, то первый эффект преобладает и частота переходов в поле растет. В эксперименте легко разделить эти два эффекта, измеряя температурную зависимость частоты перехода в различных электрических полях.

#### Список литературы

- [1] Lepin D. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 2. P. 436—441.
- [2] Mell H., Movaghar B., Schweitzer L. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 88. N 2. P. 531—535; Кведер В. В., Осипья Ю. А., Шальгин А. И. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. № 2. С. 694—714; Wosinski T., Figielski T. // Phys. St. Sol. (b). 1977. V. 83. N 1. P. 93—98.
- [3] Kaplan D., Solomon I., Mott N. // J. de Physique (Lett). 1978. V. 39. N 4. P. 51—54.
- [4] Мима Л. С., Третьяк О. В. // ФТП. 1981. Т. 15. № 9. С. 1729—1732.
- [5] Львов В. С., Мима Л. С., Третьяк О. В. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. № 4. С. 1557—1566.



- [6] Третьяк О. В. // Автореф. докт. дис. Киев, 1985.
- [7] Holstein T. // Phil. Mag. B. 1978. V. 37. N 4. P. 499—526.
- [8] Holstein T. // Phil. Mag. B. 1978. V. 37. N 1. P. 49—62.
- [9] Anderson P. W. // Phys. Rev. 1958. V. 109. N 10. P. 1492—1505.
- [10] Карпов В. Г. // Автореф. докт. дис. Л., 1986.
- [11] Абакумов В. Н., Меркулов И. А., Перель В. И., Яссьевич И. Н. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. № 4. С. 1472—1486.
- [12] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Сер. «Теоретическая физика». Т. 3. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, 1974. 752 с.
- [13] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. I. Сер. «Теоретическая физика». Т. 5. 3-е изд., доп. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [14] Sher H., Holstein T. // Phil. Mag. B. 1981. V. 44. N 3. P. 343—356.
- [15] Клиггер М. И., Карпов В. Г. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 2. С. 1687—1703.
- [16] Baraff G. A., Kane E. O., Schluter M. // Phys. Rev. B. 1980. V. 21. N 12. P. 5662—5686.

Киевский государственный университет  
им. Т. Г. Шевченко  
Киев

Поступило в Редакцию  
13 июня 1989 г.